켤레구배법의 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소해석에의 응용

Application of the Preconditioned Conjugate Gradient Method to the Generalized FEM with Global-Local Enrichment Functions

최 원 정[*] 김 희 철[**] 이 영 학[***] 김 대 진[****]

Choi, Won-Jeong Kim, Hee-Cheul Lee, Yoeng-Hak Kim, Dae-Jin

요 약

본 논문에서는 켤레구배법을 이용해 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법을 해석하는 방식을 제안한다. 이 기법은 편미분방정식의 해에 대한 정보가 충분하지 않은 경우에도 수치해석적인 방법으로 일반유한요소법의 확장함수를 구성할 수 있으며 해석 과정 중 추가의 계산 없이 좋은 성능을 지닌 전처리값 및 초기 추측치를 활용할 수 있어 국부적으로 복잡한 거동을 보이는 문제의 해석에 유리하다. 본 논문에 포함된 수치해석 예제의 결과는 제안된 기법이 가우스 소거법과 같은 직접 솔버를 이용하는 경우보다 수치 해석적으로 더 효율적임을 보여준다.

keywords : 켤레구배법, 일반유한요소해석, 전체-국부 확장함수, 선형방정식

1. 서 론

켤레구배법은 유사 반복 방법(semi-iterative method)의 하나로 사이즈가 큰 희소 행렬(large sparse matrix)의 선형방정식(linear system of equations)을 푸는데 무척 효율적이다. 그러나 이 기법은 유한요소법에 광범위하게 이용되지 못하고 있는데, 강성행렬의 조건 수(condition number)가 켤레구배법의 수렴 속도에 영향을 미쳐 때로는 가우스 소거법과 같은 직접 솔버(direct solver)를 이용하는 경우보다 더 많은 계산량을 요구할 수도 있기 때문이다. 이러한 단점을 극복하기 위해 강성행렬의 조건(conditioning)을 향상시키는 다양한 형태의 전처리값(preconditioner)이 제안되었으나 임의의 경우에 적용될 수 있는 전처리값이 없을 뿐만 아니라 대부분의 경우에 있어 이의 구성이 많은 계산량을 요구한다. 이에 본 논문에서는 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법을 켤레구배법을 이용해 효과적으로 해석하는 방식을 제안한다. 이 기법은 편미분방정식의 해에 대한 정보가 충분하지 않은 경우에도 수치해석적인 방법으로 일반유한요소법의 확장함수를 구성할 수 있으며 해석 과정 중 추가의 계산 없이 좋은 성능을 지닌 전처리값 및 초기 추측치를 활용할 수 있어 국부적으로 복잡한 거동을 보이는 문제의 해석에 유리하다.

2. 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법

* 학생회원 경희대학교 건축공학과 석사과정 choiwj@khu.ac.kr

** 정회원 경희대학교 건축공학과 교수 kimhc@khu.ac.kr

*** 정회원 경희대학교 건축공학과 조교수 leeyh@khu.ac.kr

**** 정회원 경희대학교 건축공학과 전임강사 djkim@khu.ac.kr

일반유한요소법의 확장함수를 구성하기 위한 전체-국부기법은 (Duarte and Kim, 2009, Kim et al. 2010)에 제시되었으며 이 기법은 상호 의존적인 전체 및 국부 스케일 문제의 해에 기반하고 있다. 국부 문제(local problem)는 3차원 균열 주변의 미세 스케일(fine scale) 거동을 묘사하는데 초점을 맞추며 전체 문제(global problem)는 거시 스케일의 거동을 다룬다. 이를 편의상 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법 ($GFEM^{g-l}$)으로 명명한다.

2.1. 초기 전체 문제

힘의 평형을 묘사하는 편미분방정식은 3차원 영역(domain) $\overline{\Omega}_G = \Omega_G \cup \partial\Omega_G$에 정의되며 이의 경계는 $\partial\Omega_G^u \cap \partial\Omega_G^\sigma = 0$을 만족시키는 두 가지 영역의 합 $\partial\Omega_G = \partial\Omega_G^u \cup \partial\Omega_G^\sigma$으로 구성된다. 영역 Ω_G에 정의된 힘의 평형 방정식과 구성 방정식은

$$\nabla \cdot \sigma = 0 \ , \ \sigma = C : \epsilon \tag{1}$$

으로 정의되며 경계 조건은 $\partial\Omega_G$에

$$u = \overline{u} \ \text{ on } \ \partial\Omega_G^u \ , \ \sigma \cdot n = \overline{t} \text{ on } \ \partial\Omega_G^\sigma \tag{2}$$

으로 주어진다. C는 Hooke 텐서, n은 $\partial\Omega_G^\sigma$에 직교하는 바깥 방향으로의 단위 벡터이며 $\overline{t}$와 $\overline{u}$는 경계치 문제의 주어진 견인력(traction)과 변위(displacement)이다. u_G^0는 식 (1)과 (2)에 의해 정의되는 문제의 일반유한요소해로 다음의 적분식으로부터 구한다:

$\forall v_G^0 \in X_G^0(\Omega_G)$에 대해 $u_G^0 \in X_G^0(\Omega_G) \subset H^1(\Omega_G)$ 을 만족시키는 다음 적분식의 해 u_G^0를 구하라.

$$\int_{\Omega_G} \sigma(u_G^0) : \epsilon(v_G^0) \mathrm{d}x + \eta \int_{\partial\Omega_G^u} u_G^0 \cdot v_G^0 \mathrm{d}s = \int_{\partial\Omega_G^\sigma} \overline{t} \cdot v_G^0 \mathrm{d}s + \eta \int_{\partial\Omega_G^u} \overline{u} \cdot v_G^0 \mathrm{d}s, \tag{3}$$

$X_G^0(\Omega_G)$는 Ω_G에 정의된 힐베르트 해 공간 $H^1(\Omega_G)$의 일반유한요소 형상함수를 이용한 이산화(discretization)이다. 식 (3)의 변수 η는 벌칙계수(penalty parameter)이다. 식 (3)에 의해 정의된 문제를 풀기 위해 일반적으로 성긴 유한요소망을 사용하며 편의상 이 문제를 선형 초기 전체 문제(linear initial global problem)라 명명한다.

2.2. 국부 문제

Ω_L을 균열 선단(crack front) 주변과 같이 국부적인 복잡한 거동을 보이는 Ω_G의 하부영역(subdomain)으로 정의하고 다음의 국부 문제의 해 u_L를 구한다:

$\forall v_L \in X_L(\Omega_L)$에 대해 $u_L \in X_L(\Omega_L) \subset H^1(\Omega_L)$ 을 만족시키는 다음 적분식의 해 u_L를 구하라.

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_G} \sigma(u_L) : \epsilon(v_L) \mathrm{d}x + \eta \int_{\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G^u} u_L \cdot v_L \mathrm{d}s + \kappa \int_{\partial\Omega_L \setminus (\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G)} u_L \cdot v_L \mathrm{d}s = \\ &\int_{\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G^\sigma} \overline{t} \cdot v_L \mathrm{d}s + \eta \int_{\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G^u} \overline{u} \cdot v_L \mathrm{d}s + \int_{\partial\Omega_L \setminus (\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G)} (t(u_G^0) + \kappa u_G^0) \cdot v_L \mathrm{d}s, \end{aligned} \tag{4}$$

$X_L(\Omega_L)$는 Ω_L에 정의된 힐베르트 해 공간 $H^1(\Omega_L)$의 일반유한요소 형상함수를 이용한 이산화(discretization)이다. 이 문제의 핵심적인 사항은 초기 전체 문제의 해 u_G^0를 $\partial\Omega_L \setminus (\partial\Omega_L \cap \partial\Omega_G)$에서의 경계조건으로 이용하고 이 문제의 해 u_L는 영역 Ω_L에서의 국부적인 거동을 정확하게 묘사할 수 있다는 것이다. 변수 η는 벌칙계수(penalty parameter)이며 스프링 강성 κ은 (Kim et al. 2010)에 소개된 방식에 의해 선택할 수 있다. 이 문제를 편의상 국부 문제(nonlinear local problem)라 명명한다.

2.3. 전체-국부 확장함수와 확장 전체 문제

2.1장과 2.2장에 묘사된 초기 전체 문제와 비선형 국부 문제는 전체 문제에 전체-국부 확장함수 u_L를 공급하기 위한 사전 과정이다. u_L에 의해 확장된 전체-국부 일반유한요소 형상 함수는 다음과 같이 표현된다.

$$\phi_\alpha(x) = \varphi_\alpha(x) u_L(x). \tag{5}$$

u_L은 전체-국부 확장함수(global-local enrichment function), 이 함수에 의해 확장된 전체 문제는 확장 전체 문제(enriched global problem)이라 명명된다. 이 문제의 약식(weak formulation)은 다음과 같이 주어진다:

$\forall v_G^E \in X_G^E(\Omega_G)$에 대해 $u_G^E \in X_G^E(\Omega_G) \subset H^1(\Omega_G)$을 만족시키는 다음 적분식의 해 u_G^E를 구하라.

$$\int_{\Omega_G} \sigma(u_G^E) : \epsilon(v_G^E) \mathrm{d}x + \eta \int_{\partial\Omega_G^u} u_G^E \bullet v_G^E \mathrm{d}s = \int_{\partial\Omega_G^\sigma} \bar{t} \bullet v_G^E \mathrm{d}s + \eta \int_{\partial\Omega_G^u} \bar{u} \bullet v_G^E \mathrm{d}s, \tag{6}$$

$X_G^E(\Omega_G)$는 $X_G^E(\Omega_G)$에 식 (5)로 정의된 일반유한요소 형상 함수가 추가된 Ω_G에 정의된 힐베르트 해 공간 $H^1(\Omega_L)$의 이산화(discretization)이다. 전체-국부 확장함수는 3차원 탄성 문제를 해석할 경우 국부 문제의 자유도의 개수와 상관없이 성긴 전체 문제의 요소망에 절점 당 오직 3개의 자유도만을 추가한다. 따라서 전체 문제의 크기를 크게 증가시키지 않으면서도 주어진 탄소성 문제의 미소 스케일 거동을 묘사하기 위해 국부 문제에 세분화된 요소망을 사용하거나 높은 차수의 형상 함수를 사용하는 것이 가능하다.

3. 켤레구배법의 전체-국부 확장함수를 지닌 유한요소해석에의 적용

본 장에서는 전처리된 켤레구배법을 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법에 적용하는 절차를 소개한다. 제안된 일반유한요소법은 해를 구하는 과정에서 성능이 뛰어난 전처리값(preconditioner)과 초기 추측치(initial guess)가 얻어질 수 있어 켤레구배법을 이용해 선형방정식(linear system of equations)을 풀 경우 적은 계산량으로 정확한 해를 구할 수 있다.

3.1 전처리를 이용하는 켤래구배법

켤레구배법은 선형 방정식을 푸는 반복 방법(iterative method) 중 가장 효율적이면서도 간단한 방법으로 1952년 Hestenes와 Stiefel에 의해 제안되었다(Hestenes and Stiefel, 1952). 이는 선형방정식 $Ax = b$의 해를 구하는 과정을 포텐셜 $\Pi = x' Ax/2 - bx$를 최소화하는 문제로 환원시킬 수 있다는 아이디어에 근거하고 있다. 뿐만 아니라 켤레구배법은 사실상 유사 반복 방법(semi-iterative method)으로 n개의 선형방정식을 n번의 반복으로 정확한 해를 구할 수 있음이 보장된다. 하지만 켤레구배법이 LU factorization과 같은 직접 솔버(direct solver)보다 항상 우수한 것은 아니다. 켤레구배법의 수렴속도(convergence rate)는 행렬 A의 조건 수(condition number)에 크게 의존하여 경우에 따라 직접 솔버를 이용하는 경우보다 더 많은 계산량이 요구되기도 한다. 따라서 실무에 있어 거의 대부분의 경우에 행렬 A의 조건(conditioning)을 향상시키기 위한 전처리값 C가 이용된다. 다음은 본 논문에서 이용되는 전처리된 켤레구배법의 알고리즘으로, 만약 전처리(preconditioning) 과정을 수행하지 않을 경우 $\overline{r_k} = r_k$를 이용한다.

a) 초기화: 초기 추측치 x_0를 선택한 후 다음의 값을 구한다.

$r_0 = b - Ax_0,\ \overline{r_0} = C^{-1} r_0,\ p_0 = \overline{r_0}$

b) 켤레구배 알고리즘: k = 0, 1, 2 ... 에 대하여 다음의 과정을 수행한다.

$\lambda_k = \bar{r}_k^T r_k / p_k^T A p_k$

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k p_k$$
$$\bar{r}_{k+1} = C^{-1} r_{k+1}$$
$$\alpha_k = \bar{r}_{k+1}^T r_{k+1} / \bar{r}_k^T r_k$$
$$p_{k+1} = \bar{r}_{k+1} + \alpha_k p_k$$

3.2. 켤래구배법의 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법에의 적용

제안된 전체-국부 확장함수를 이용하는 일반유한요소법은 항상 초기 전체 문제의 해를 구하는 과정을 거쳐야 한다. 2.3장에서 언급된 바와 같이 확장 전체 문제의 오직 몇몇 절점만이 국부 문제의 해로 확장되므로 초기 및 확장 전체 문제의 강성행렬이 서로 아주 유사하기 때문에 factorize된 초기 전체 문제의 강성행렬을 확장 전체 문제를 켤레구배법으로 풀기 위한 전처리값으로 이용할 수 있다. 뿐만 아니라 초기 전체 문제의 해 또한 확장 전체 문제의 해와 유사하기 때문에 이를 확장 전체 문제의 초기 추측치로 활용할 수 있다. 이와 같은 아이디어에 근거한 전처리된 켤레구배법을 이용한 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소 해석 알고리즘은 다음과 같다.

(a) 국부 문제의 경계 조건 및 확장 전체 문제의 해석에 필요한 전처리값을 제공하기 위해 초기 전체 문제를 푼다. 초기 전체 문제의 선형방정식은 반드시 직접 솔버를 이용해 풀어야 하며, factorize된 형태의 초기 전체 문제의 강성행렬과 이의 해는 확장 전체 문제의 해석을 위해 저장된다.

(b) 국부적으로 복잡한 거동을 보이는 영역의 해를 정확하게 묘사하기 위해 각각의 국부 문제를 직접 솔버를 이용해 푼다. 필요에 따라 각각의 국부 문제의 해는 병렬 연산(parallel computation)을 통해 구할 수 있다.

(c) (b) 단계에서 구한 국부 문제의 해를 이용해 전체 문제를 확장한다. (a) 단계에서 얻어진 factorize된 형태의 초기 전체 문제의 강성행렬의 전처리값으로 초기 전체 문제의 해를 초기 추측지로 활용해 확장 전체 문제를 켤레구배법으로 해석한다. 4장의 수치 해석 예제의 결과에 나타난 바와 같이 직접 솔버를 이용한 경우보다 훨씬 적은 계산량으로 정확한 확장 전체 문제의 해를 켤레구배법을 이용해 구할 수 있다.

4. 수치 해석 예제

본 장에서는 전처리된 켤레구배법을 이용한 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소 해석의 계산상의 효율성을 검증하기 위해 그림 1에 나타난 수직방향의 견인력이 작용하는 다섯개의 균열을 포함한 판(plate with five cracks) 문제를 해석한다. 주어진 문제의 기하 형상이 y축 방향의 중심선에 대해 대칭이므로 전체 도메인의 절반만 모델링한다. 예제의 해석에 다음의 값(parameter)들이 이용된다: 평면 내 기하학적 치수 $d=36.0, a_1=18.0, a_2=12.0, a_3=6.0, b_1=b_2=6.0$; 판의 두께 $t=6.0$; 견인력 t_y=20.0; 탄성계수(E) = 2.0×10^5; 포아송 비(ν) = 0.33.

전체-국부 확장함수를 이용한 일반유한요소 해석에 있어 각각의 균열선단을 중심으로 총 다섯 개의 국부 문제가 구성되고 그 해가 전체 문제의 절점을 확장하는데 이용된다. 국부 문제의 확장으로 인해 확장 전체 문제에 추가되는 자유도의 개수는 30개 이다. 주어진 예제는 세 가지 차수의 일반유한요소 형상함수(p = 1, 2, 3)를 이용해 해석되며 각각의 차수의 형상함수에 해당하는 전체 자유도의 개수는 각각 630, 2430, 6030이다. 켤레구배 수렴을 상대 잔류값의 노름(norm of relative residual)은 $\| r_{\text{rel.}} \| = \| b - Ax \| / \| b \|$ 로 정의되며 본 예제의 해석에는 위한 오차 허용치는 10^{-5}가 이용된다.

그림 2는 앞서 언급된 서로 다른 세 가지의 크기를 지니는 경우에 대해 초기 전체 문제의 해를 초기 추측치로 이용한 켤레구배법(PCGM w/ initial guess), 초기 추측치로 영벡터를 이용하는 켤레구배법(PCGM w/o initial guess), 가우스 소거법(Gauss elimination)을 이용하여 확장 전체 문제를 해석한 결과를 보여준다. 로그 스케일로 그려진 그림 2로부터 가우스 소거법을 이용한 결과의 기울기가 켤레구배법을 이용한 경우보다 더 큼을 알 수 있다. 이는 선형방정식을 풀 때 직접 솔버가 요구하는 연산의 개수가 선형방정식 개수의 세제곱에 비례하고 반복 방법을 이용할 경우 제곱에 비례하는 잘 알려진 사실과 일치한다. 또한 초기 전체 문제의 해를 초기 추측치로 이용한 켤레구배법이 영벡터를 초기 추측치로 이용한 경우보다 약간 더 적은 CPU 시간을 요구함을 알 수 있는데 제안된 $GFEM^{g-l}$에 전처리된 켤레구배법의 응용이 효과적임을 보여준다.

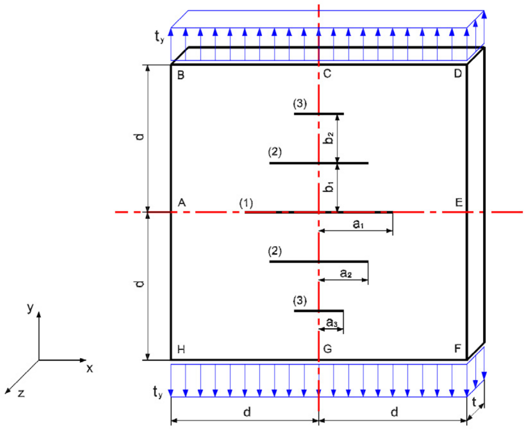

그림 1. 다섯 개의 균열을 포함하는 판.

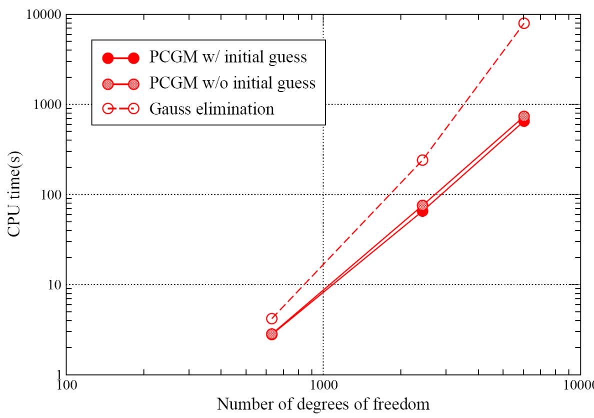

그림 2. 켤레구배법과 가우스 소거법의 해석 시간 비교.

5. 결론

본 논문에서는 켤레구배법을 이용해 전체-국부 확장함수를 지닌 일반유한요소법을 해석하는 방식을 제안하였다. 제안된 기법은 해석 과정 중 추가의 계산 없이 좋은 성능을 지닌 전처리값 및 초기 추측치를 활용할 수 있어 국부적으로 복잡한 거동을 보이는 문제의 해석에 유리하며, 가우스 소거법과 같은 직접 솔버를 이용하는 경우보다 수치 해석적으로 더 효율적임을 입증하였다. 추후 제안된 기법을 보다 유용하게 활용할 수 있는 수치 예제를 해석함으로써 이의 우수성을 보일 예정이다.

감사의 글

이 논문은 2010년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임(2010-0024387).

참고문헌

Duarte, C.A. and Kim, D.-J. (2008) Analysis and Applications of a Generalized Finite Element Method with Global-Local Enrichment Functions *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering,* 197(6-8) pp.487-504.

Kim, D.-J., Pereira, J.P. and Duarte, C.A. (2010) Analysis of three-dimensional fracture mechanics problems: A two-scale approach using coarse generalized FEM meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81(3) pp.335 - 365.

Hestenes, M.R. and Stiefel, E. (1952) Methods of conjugate gradients for solving linear systems *Journal of Research of the National Bureau of Standards,* 49 pp.409-436.